

УДК 535.37

Барабаш О.В.¹, к.ф.-м.н., асистент.

Спектр електрона у графеновій стрічці з урахуванням взаємодії Рашби

Отримано хвильову функцію та дисперсійне рівняння електрона в графеновій стрічці зі спин-орбітальною взаємодією Рашби та з граничними умовами типу zigzag. Показано, що врахування спин-орбітальної взаємодії призводить до двократного розщеплення спектральних ліній (знімається виродження по спіну) та зникненню лінійної залежності енергії від імпульсу поблизу рівня Фермі.

Ключові слова: графенова стрічка, спин-орбітальна взаємодія Рашби, дисперсійне рівняння.

¹ Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 03680, м. Київ, пр-т. Глушкова 4д, e-mail: obar@univ.kiev.ua

Статтю представив д.ф.-м.н., проф. Єжов С.М.

Вступ

Розглянемо шар графену у вигляді нескінченної в x -напрямку стрічки, яка має скінченну ширину L в y -напрямку. Графенова стрічка може мати два типи крайових конфігурацій: zigzag edge та armchair edge (рис. 1).

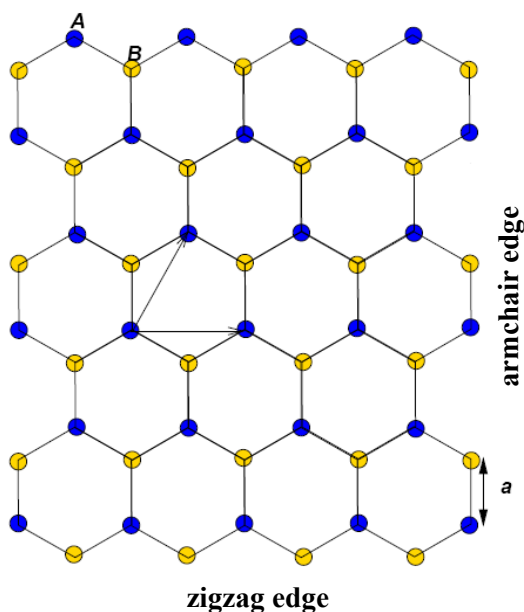


Рис. 1 Крайові конфігурації zigzag та armchair

O. V. Barabash¹, PhD

Electron's spectrum in graphene ribbon with Rashba spin-orbit interaction.

We have calculated wave function and electron's dispersion relation in graphene ribbon with regard to Rashba spin-orbit interaction and zigzag boundary conditions on the edges. It was shown that spin-orbit interaction leads to a double splitting of the spectrum lines (spin splitting) and vanishing linear dependence of the energy from the momentum near Fermi level.

Key Words: graphene ribbon, spin-orbit Rashba interaction, dispersion relation.

¹ Taras Shevchenko National University of Kyiv, 03680, Kyiv, Glushkova st., 4d, e-mail: obar@univ.kiev.ua

Для нескінченної в x -напрямку стрічки огибаюча функція $\psi(x, y)$ має вигляд

$$\psi(x, y) = e^{ikx} \begin{pmatrix} \varphi_A(y) \\ \varphi_B(y) \end{pmatrix}, \quad (1)$$

де

$$\varphi_i(y) = \begin{pmatrix} \chi_1^i \\ \chi_2^i \end{pmatrix}, \quad i = A, B$$

двокомпонентні функції підґраток A та B .

Енергетичний спектр електрону в графеновій стрічці для двох типів крайових станів був обрахований в роботі [2]. Було знайдено, що у випадку крайового стану типу zigzag дисперсійне рівняння має вигляд

$$\varepsilon^2 = k_x^2 - z^2, \quad (2)$$

де

$$e^{-2zL} = \frac{k_x - z}{k_x + z},$$

$\varepsilon = E/v_F$, E – енергія електрону. Якщо ж графен має краї типу armchair, то спектр має інший вигляд

$$\varepsilon^2 = k_n^2 + k_y^2, \quad k_n = \frac{\pi n}{L} - \frac{4\pi}{3a_0}, \quad n \in \mathbb{Z}.$$

Тут a_0 – період ґратки Браве.

Проте, як було зазначено в роботі [3], на електронні властивості графену суттєво впливає спін-орбітальна взаємодія, яка не була врахована авторами [2]. В роботі [3] був знайдений енергетичний спектр графену зі спін-орбітальною взаємодією, але без врахування крайових умов:

$$E(E \pm \lambda) = \gamma^2 k^2. \quad (3)$$

В огляді [1] досліджувалися крайові стани у графеновій стрічці при наявності щілини та магнітного поля.

В даній роботі ставиться задача знаходження енергетичного спектру графенової стрічки зі спін-орбітальною взаємодією Рашби та з краями типу zigzag.

Ефективний гамільтоніан при наявності спін-орбітальної взаємодії

З врахуванням спіну кількість станів електрону подвоюється і замість двохкомпонентної функції $\psi = (\varphi_A, \varphi_B)^T$ будемо мати чотирьох компонентну функцію аналогічного вигляду, де тепер φ_A та φ_B – двохкомпонентні спінори. Відповідно цьому, з врахуванням спін-орбітальної взаємодії ефективний гамільтоніан 2×2 переходить в оператор 4×4 .

Ефективний 4×4 гамільтоніан графену із зовнішнім спін-орбітальним зв'язком в околі \mathbf{K} -точки може бути представлений у вигляді кронекерівського добутку 2×2 матриць σ та \mathbf{s} [3]:

$$H_K = \gamma(\sigma \cdot \hat{\mathbf{p}}) + \frac{\lambda}{2}(\sigma \times \mathbf{s}),$$

де $\gamma = \hbar v$, $v \approx 10^8$ см/с – швидкість Фермі, $\lambda \approx 13$ meV – константа спін-орбітального зв'язку, $\sigma = (\sigma_1, \sigma_2)$ – матриці Паулі, $\mathbf{s} = (s_x, s_y)$ – спінові матриці. Індекс K в H_K вказує на те, що гамільтоніан діє в околі \mathbf{K} -точки зони Бріллюена. В околі \mathbf{K}' -точки ефективний гамільтоніан має вигляд

$$H_{K'} = \sigma_1 H_K \sigma_1 = (H_K)^*.$$

В явному вигляді гамільтоніан H_K записується

$$H_K = \begin{pmatrix} 0 & \gamma \hat{p}_- + i\lambda s_- / 2 \\ \gamma \hat{p}_+ - i\lambda s_+ / 2 & 0 \end{pmatrix} \quad (4)$$

де $\hat{p}_\pm = p_x \pm ip_y$, $s_\pm = s_x \pm is_y$.

Розрахунок енергетичного спектру

Огинаюча функція ψ задовольняє рівнянню Шредінґера

$$H_K \psi = E \psi \quad (5)$$

з гамільтоніаном H_K з (4) та наступним крайовим умовам:

$$\psi_A(y=L)=0, \quad \psi_B(y=0)=0.$$

Підставляючи анзац (1) в (5), отримуємо наступні рівняння на функції φ_i :

$$\begin{cases} \gamma(k_x - \partial_y)\varphi_B + \frac{i\lambda}{2}s_- \varphi_B = E \varphi_A \\ \gamma(k_x + \partial_y)\varphi_A - \frac{i\lambda}{2}s_+ \varphi_A = E \varphi_B \end{cases} \quad (6)$$

Щоб виключити з цієї системи спінор φ_A подіємо на перше рівняння оператором $(k_x + \partial_y)$, після чого виразимо функцію $(k_x + \partial_y)\varphi_A$ з другого рівняння системи (6). В результаті отримаємо

$$\begin{aligned} \gamma^2(k_x^2 - \partial_y^2)\varphi_B + i\lambda\gamma \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} (k_x + \partial_y)\varphi_B = \\ = iE\lambda \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \varphi_A + E^2 \varphi_B. \end{aligned}$$

Підставляючи сюди спінор φ_A з першого рівняння (6) знаходимо шукане рівняння на спінор φ_B .

$$\begin{aligned} \gamma^2(k_x^2 - \partial_y^2)\varphi_B + i\lambda\gamma \begin{pmatrix} 0 & \partial_y - k_x \\ \partial_y + k_x & 0 \end{pmatrix} \varphi_B = \\ = \begin{pmatrix} E^2 - \lambda^2 & 0 \\ 0 & E^2 \end{pmatrix} \varphi_B. \end{aligned}$$

В розгорнутому вигляді це рівняння на функції χ_1 та χ_2 має вигляд:

$$\begin{cases} \gamma^2(k_x^2 \chi_1 - \chi_1'' + i\lambda(\chi_2 - k_x \chi_2)) = (E^2 - \lambda^2) \chi_1 \\ \gamma^2(k_x^2 \chi_2 - \chi_2'' + i\lambda(\chi_1 + k_x \chi_1)) = E^2 \chi_2 \end{cases} \quad (7) \quad \det \begin{vmatrix} \gamma^2(k_x^2 - \alpha^2) - E^2 + \lambda^2 & i\gamma(\alpha - k_x) \\ i\gamma(\alpha + k_x) & \gamma^2(k_x^2 - \alpha^2) - E^2 \end{vmatrix} = 0.$$

Будемо шукати розв'язок цього рівняння у вигляді

$$\chi_1(y) = ae^{\alpha y}, \quad \chi_2(y) = be^{\alpha y}.$$

Підстановка цих функцій в попередні рівняння системи (7) дає

$$\begin{cases} a\gamma^2(k_x^2 - \alpha^2) + i\gamma b(\alpha - k_x) = (E^2 - \lambda^2)a \\ b\gamma^2(k_x^2 - \alpha^2) + i\gamma a(\alpha + k_x) = E^2 b \end{cases} \quad (8)$$

Це система однорідних лінійних рівнянь на a та b . Вона має нетривіальний розв'язок, якщо її визначник дорівнює нулю.

$$\begin{aligned} \varphi_A &= N_1 \begin{pmatrix} \frac{i\gamma}{E}(k_x - \alpha_1) \\ 1 \end{pmatrix} e^{\alpha_1 y} + N_2 \begin{pmatrix} \frac{i\gamma}{E}(k_x + \alpha_1) \\ 1 \end{pmatrix} e^{-\alpha_1 y} + N_3 \begin{pmatrix} \frac{-i\gamma}{E}(k_x - \alpha_1) \\ 1 \end{pmatrix} e^{\alpha_2 y} + N_4 \begin{pmatrix} \frac{-i\gamma}{E}(k_x - \alpha_1) \\ 1 \end{pmatrix} e^{-\alpha_2 y} \\ \varphi_B &= N_1 \begin{pmatrix} i \\ \frac{\gamma}{E}(k_x + \alpha_1) \end{pmatrix} e^{\alpha_1 y} + N_2 \begin{pmatrix} i \\ \frac{\gamma}{E}(k_x - \alpha_1) \end{pmatrix} e^{-\alpha_1 y} + N_3 \begin{pmatrix} -i \\ \frac{\gamma}{E}(k_x + \alpha_1) \end{pmatrix} e^{\alpha_2 y} + N_4 \begin{pmatrix} -i \\ \frac{\gamma}{E}(k_x - \alpha_1) \end{pmatrix} e^{-\alpha_2 y} \end{aligned}$$

Константи N_i визначаються з граничних умов: $\varphi_B(0) = 0$, $\varphi_A(L) = 0$. Знову маємо чотири лінійних однорідних рівнянь на N_i . Прирівнюючи визначник цієї системи до нуля, отримуємо неявне рівняння на енергетичний спектр електрона в графені.

$$\begin{aligned} e^{(\alpha_1 - \alpha_2)L} (2k_x + \alpha_2 - \alpha_1)^2 + e^{(\alpha_1 - \alpha_2)L} (2k_x + \alpha_1 - \alpha_2)^2 - \\ e^{(\alpha_1 + \alpha_2)L} (2k_x - \alpha_2 - \alpha_1)^2 + e^{-(\alpha_1 + \alpha_2)L} (2k_x + \alpha_1 + \alpha_2)^2 = \\ = 8\alpha_1 \alpha_2 \end{aligned} \quad (9)$$

В граничному випадку $\lambda=0$ це рівняння зводиться до вигляду (2).

Аналіз отриманих результатів

Частинний розв'язок рівняння (9) має вигляд

$$E(E \pm \lambda) = \gamma^2 k^2 \quad (10)$$

Розкриваючи цей визначник, отримуємо рівняння на α :

$$\alpha_{1,2}^2 = k_x^2 - \frac{E(E \pm \lambda)}{\gamma^2}.$$

Всього маємо чотири різних значення α та, відповідно, чотири незалежних розв'язки системи (7). Зв'язок між коефіцієнтами a та b знайдемо, підставляючи вираз для α в систему рівнянь (8).

$$b = \mp \frac{i\gamma}{E}(k_x + \alpha)a.$$

Для зручності перепозначимо $a = \pm iN$. Тоді для функцій φ_i маємо наступний загальний розв'язок:

i в точності співпадає зі спектром (3), що був знайдений в роботі [3] для нескінченного графенового шару (з врахуванням спіно-орбітальної взаємодії). При $\lambda=0$ цей розв'язок описує безмасову моду $E^2 = \gamma^2 k^2$. При $\lambda \neq 0$ відбувається розщеплення безмасової гілки на дві компоненти. Величина розщеплення дорівнює

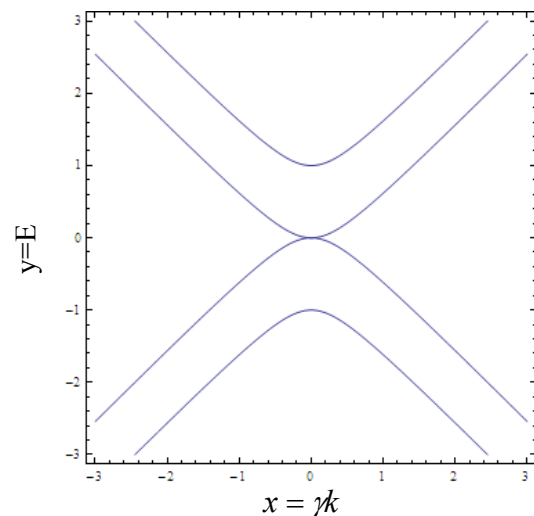


Рис. 2 Дисперсійне рівняння (12)

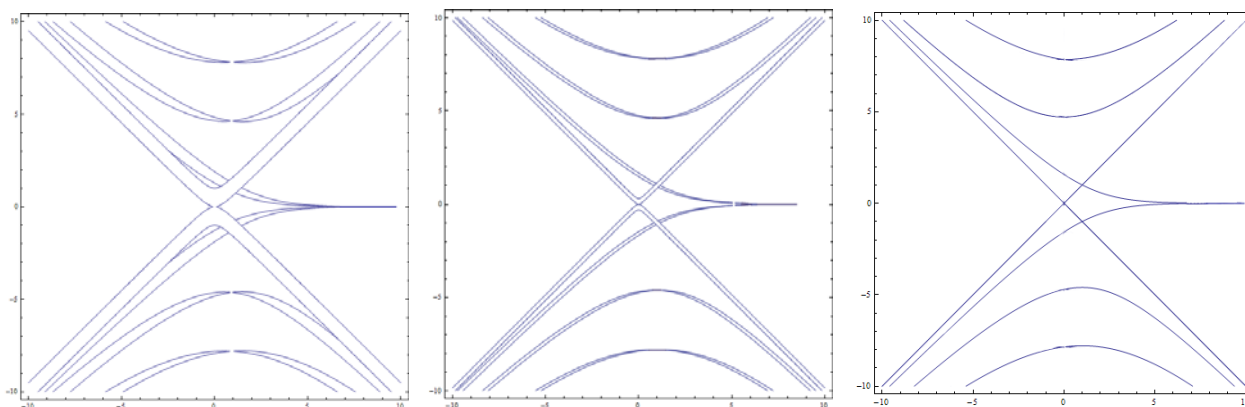


Рис. 3. Дисперсійне рівняння (11) для різних значень параметру спіно-орбітальної взаємодії $\delta = 1$, $\delta = 0.3$ та $\delta = 0$. По осях координат відкладені безрозмірні змінні $x = k_x L$, $y = EL/\gamma$.

$$\Delta E = \lambda.$$

Інший ефект, до якого призводить врахування спіно-орбітальної взаємодії – спотворення спектру в околі діраківських точок. На Рис. 2 показано графік залежності E від k_x , що відповідає рівнянню (10). Як видно з цього графіку, ми вже не маємо лінійної залежності енергії від імпульсу поблизу нуля. Похідна $(dE/dk)_{k=0} = 0$ як для нерелятивістських частинок.

Аналіз рівняння (9) проводився графічно за допомогою програми Mathematica.

Щоб з'ясувати, як впливає спіно-орбітальна взаємодія Рашби на спектр, порівняємо цей графік з графіками залежності $E = E(k_x)$ при трьох значеннях параметру масштабу спіно-орбітальної взаємодії $\delta = 1$, $\delta = 0.3$ та $\delta = 0$ (зменшення параметру δ відповідає зменшенню спіно-орбітальної взаємодії, значення $\delta = 0$ – відсутність взаємодії Рашби).

Як видно з графіків (Рис. 3), врахування спіно-орбітальної взаємодії призводить до двократного розщеплення спектральних ліній (знімається

виродження по спіну). Цей ефект може бути спостережений на експерименті.

Висновки

1. У роботі досліджено енергетичний спектр електрону в графеновій стрічці зі спіно-орбітальною взаємодією Рашби та з граничними умовами типу zigzag.
2. Отримано хвильову функцію та дисперсійне рівняння електрона в графеновій стрічці. Знайдено частинний розв'язок дисперсійного рівняння, який у випадку відсутності спіно-орбітальної взаємодії переходить в безмасову моду.
3. Показано, що врахування спіно-орбітальної взаємодії призводить до двократного розщеплення спектральних ліній (знімається виродження по спіну) та зникненню лінійної залежності енергії від імпульсу поблизу рівня Фермі.

Список використаних джерел

1. Gusynin V.P., Miransky V.A., Sharapov S.G., and Shovkovy I.A., *Fizika Nizkikh Temperatur*, **34**, No. 10, (2008).
2. Castro A. H., Guinea F., Peres N., Novoselov K. S., Geim A. K. The electronic

properties of graphene, *Review of Modern Physics*, **81**, 109 (2009).

3. Rashba E.I. Graphene with structure-induced spin orbit coupling: spin-polarized states, spin zero modes, and quantum Hall effect, *Phys. Rev. B*, **79**, 161409(R), (2009).

Надійшла до редколегії 05.02.13